

Oxidant-free Au(I)/Au(III) catalysis: Rational development of hemilabile proximity-guided N-heterocyclic carbenes

Autorzy

Pengcheng Gao
Jihong Xu
Wenchao Chu
Yanhong Liu
Alejandro Cervantes-Reyes
Elwira Bisz
Błażej Dziuk
Roger Lalancette
Roman Szostak
Dongju Zhang
Michał Szostak

Rok wydania

2026

Czasopismo

Science Advances

Numer woluminu

12

Strony

aed3424/1-aed3424/14

DOI

10.1126/sciadv.aed3424

Kolekcja

Naukowa

Streszczenie

In the past two decades, oxidant-free, ligand-enabled gold(I)/gold(III) [Au(I)/Au(III)] catalysis has become a potential complement to palladium(0)/palladium(II) [Pd(0)/Pd(II)] catalysis in diverse transformation, yet broadly general ligands for Au(I)/Au(III) catalysis remain lacking. Herein, we report a platform for ligand-enabled Au(I)/Au(III) catalysis through the rational development of hemilabile ImQun N-heterocyclic carbene (NHC) nitrogen (N), carbon (C) ligands (ImQun = imidazo[1,5-a]quinoline). Intriguingly, the best Au catalyst ImQunDippNMe₂AuCl features the shortest distances between the chelating N atom and the Au center for oxidant-free reaction paradigms. The excellent activity has been demonstrated in alkene difunctionalization via the oxidant-free Au(I)/Au(III) cycle through C–O, C–N, and C–C bond formation, including highly challenging aromatic olefins (>60 examples) and late-stage modification of complex pharmaceuticals (>15 examples). Comprehensive density functional theory (DFT) studies have provided fundamental insight into the reaction mechanism and highlight the central effect of this NHC on the Au(I)/Au(III) redox cycle. The facile access to hemilabile, closely coordinating NHC will enable accelerated development of Au(I)/Au(III) oxidant-free reactivity paradigms using powerful Au catalysis.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY-NC

Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją).

Pełny tekst licencji: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode>

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1126/sciadv.aed3424>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.science.org/journal/sciadv>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-21 13:48:21

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/904BZ2g>.